# シュレーディンガー作用素の負の固有値の個数の評価について (微分方程式の大局理論と固有値の分布)



中野, 史彦

数理解析研究所講究録 1402 巻 2004 年 69-75



# シュレーディンガー作用素の負の固有値の個数の評価について

中野史彦（東北大学理学研究科）
Fumihiko Nakano (Mathematical Institute, Tohoku University)

概要

シュレーディンガー作用素の負の固有値の個数の評価について、知られている結果を復習し[3, 4, 5]、2次元の場合の最近の結果 [6] の紹介を行う。

次のシュレーディンガー作用素を考える。

$$H=-\triangle+V \quad \text{on } L^2(\mathbf{R}^d).$$

区間 $I(\subset\mathbf{R})$ に対して $I$ に対応する $H$ のスペクトル射影作用素を $P_I(H)$ とする。

$$N_I(H)=\dim \text{ Ran } P_I(H)$$

とおいて、$H$ の負の固有値の個数を $N_{(-\infty,0)}(H)$ と表す。本講演の目的は、$N_{(-\infty,0)}(H)$ について知られている主な結果を復習するとともに、2次元の場合についての最近の結果を紹介することである。Birman, Schwinger による次の評価はよく知られている。

**Theorem 1 (Birman-Schwinger bound)** $d=3$ のとき、

$$N_{(-\infty,0)}(H)\leq\frac{1}{(4\pi)^2}\|V\|_R^2, \quad \|V\|_R^2:=\int_{\mathbf{R}^3}\int_{\mathbf{R}^3}\frac{|V(x)||V(y)|}{|x-y|^2}dxdy. \tag{1}$$

式 (1) は、$\|V\|_R<\infty$ のときにのみ意味を持つものと解釈する。$\|V\|_R<\infty$ のとき、$-\triangle+V$ は2次形式を用いることにより、適当な定義域上において自己共役作用素として定義され、$\sigma_{ess}(-\triangle+V)=[0,\infty)$ である。

*Proof.* min-max principle により、$V=-W\leq 0$ としてよい。また、$V\in C_0(\mathbf{R}^3)$ としてよい。実際、$V\in C_0(\mathbf{R}^3)$ のときに (1) が証明されたとすると、$\|V\|_R^2<\infty$ なる $V$ に対しては $\{V_n\}\subset C_0(\mathbf{R}^3)$ で $\|V-V_n\|_R\to 0$ となるようなものをとると、強レゾルベント収束の意味で $-\triangle+V_n\to-\triangle+V$ となることから、任意の $E<0$ に対して

$$N_{(-\infty,E]}(-\triangle+V)\leq\limsup_{n\to\infty}N_{(-\infty,E]}(-\triangle+V_n).$$

よって $\|V\|_R<\infty$ となるような $V$ に対しても (1) が示される。

次に $H_\lambda := -\Delta - \lambda W$, $\lambda > 0$ とおくと、$H_\lambda$ の負の固有値 $E(\lambda)$ は $\lambda$ について連続かつ狭義単調減少であるから、$E < 0$ を任意にとると、

$$N_{(-\infty,E]}(-\Delta + V) = \sharp\{\lambda \in (0,1] : E \text{ is an eigenvalue of } H_\lambda\}. \tag{2}$$

$H_\lambda$ が $E$ を固有値に持つとする。このとき、対応する固有関数を $\varphi$ とすると、$\psi = \sqrt{W}\varphi$ は $K_E = \sqrt{W}(-\Delta - E)^{-1}\sqrt{W}$ の固有値 $\frac{1}{\lambda}$ の固有関数である。逆に $\psi$ が $K_E$ の固有値 $\frac{1}{\lambda}$ の固有関数であるとすると、$\varphi = \lambda(-\Delta - E)^{-1}\sqrt{W}\psi$ は $H_\lambda$ の固有値 $E$ に対応する固有関数である。よって (2) と合わせると、Birman-Schwinger principle と呼ばれる次の等式を得る。

$$N_{(-\infty,E]}(H) = N_{[1,\infty)}(K_E). \tag{3}$$

$K_E$ のヒルベルト・シュミットノルムをとって $E \uparrow 0$ とすることにより、式 (1) を得る。□

$d \neq 3$ のときは、この手法は直接適用できない。実際、$d \leq 2$ のときは、$E \uparrow 0$ とすると、$K_E$ の積分核が発散し、$d \geq 4$ のときは、多くの場合に $\|V\|_R = \infty$ となってしまう。しかし、(1) の証明方法を用いることにより、Lieb-Thirring inequality と呼ばれる固有値のベキ乗の和の評価が得られる。

$$\sum_j |e_j|^\gamma \leq L_{\gamma,d}\int_{\mathbf{R}^d} |V_-(x)|^{\frac{d}{2}+\gamma}dx. \tag{4}$$

ここで、$\{e_j\}_j$ は $-\Delta + V$ の負の固有値、$\gamma \geq \frac{1}{2}(d=1)$, $\gamma > 0(d=2)$, $\gamma \geq 0(d=3)$ である。不等式 (4) の最良定数 $L_{\gamma,d}$ と準古典近似により phase space volume を計算して得られる値 $L^d_{\gamma,d}$ との関係を調べることは重要である。いくつかの場合においては、これが等しいことが知られている[1]。

式 (1) の右辺 $\|V\|_R^2$ は、$|V|$ が大きいときには $|V|^2$ のオーダーであるから、$V \in C_0(\mathbf{R}^d)$ について成立つ Weyl 評価 [2]

$$N_{(-\infty,0)}(-\Delta + \lambda V) = \frac{\tau_d}{(2\pi)^d}\int_{\mathbf{R}^d} V_-(x)^{\frac{d}{2}}dx\,(1 + o(1)), \quad \text{as } \lambda \to \infty \tag{5}$$

との比較により、$|V|$ が大きいときにはよい評価ではないだろうと推測される。これは、絶対値のより大きな固有値は、(3) により $K_E$ のより大きな固有値に対応することからもわかる。しかし、$d \geq 3$ のときには次の結果がある。

---

[1] 詳しくは [2, Theorem 12.44] 及びその参考文献を参照のこと

[2] [3, Theorem VIII.79]. $\tau_d$ は $d$ 次元単位球の体積

**Theorem 2 (Cwikel-Lieb-Rosenbljum bound)** *$d \geq 3$ のとき、ある定数 $c_d < \infty$ に対して次が成立つ。*

$$N_{(-\infty,0)}(H) \leq c_d \int_{\mathbf{R}^d} |V_-(x)|^{\frac{d}{2}} dx. \tag{6}$$

いくつかの証明が知られているが、1つの証明の方針は BS-principle (3) により、

$$N_{(-\infty,E]}(-\Delta - W) \leq 2\mathrm{Tr}\left(W((-\Delta - E)^{-1} - (-\Delta + W - E)^{-1})\right)$$

と評価し、右辺に現れるレゾルベントをラプラス変換により heat-semigroup を用いて書き表わす。更に、それを Brownnian bridge を用いて表現し評価することにより (6) が導かれる。$d \leq 2$ で証明が成立たない理由は、熱核の評価に現れる $(4\pi t)^{-\frac{d}{2}}$ の $t \gg 1$ における減衰が十分で無いことに起因する([3, Theorem XIII.12])。

さて、(6) を用いることにより、$d \geq 3$ のときは $V_- \in L^{\frac{d}{2}}(\mathbf{R}^d)$ であるような $V$ についても Wely 評価 (5) が証明できる[3, Theorem VIII.80]。一方、$d = 1, 2$ のときは、(6) のような評価は存在しないことが次の定理からわかる [3, Theorem VII.11]。

**Theorem 3** *$d = 1, 2$, $V \in C_0(\mathbf{R}^d)$, $V \leq 0$ とする。このとき、任意の $\lambda > 0$ に対し $N_{(-\infty,0)}(-\Delta + \lambda V) \geq 1$.*

証明は、(3) を用いて Birman-Schwinger kernel ($K_E$ の積分核) の評価の問題に帰着し、$\lim_{E\uparrow 0} \|K_E\|_{op} = \infty$ を示すことにより行われる。

*Proof.* (3) により、任意の $\lambda > 0$ に対しある $E < 0$ がとれて $N_{[\frac{1}{\lambda},\infty)}(K_E) \geq 1$ であることを示せば良い。$K_E$ は positive かつ compact であるから、任意の $\lambda > 0$ に対しある $E < 0$ がとれて、$\|K_E\|_{op} \geq \frac{1}{\lambda}$ であることを示せば良い。そのためには、$\lim_{E\uparrow 0} \|K_E\|_{op} = \infty$ を示せば十分である。$\eta \in C_0(\mathbf{R}^d)$ を $\sqrt{W}\eta \neq 0$, $\sqrt{W}\eta \geq 0$ となるようにとる。そのフーリエ変換 $\widehat{\sqrt{W}\eta}(p)$ は連続で $p = 0$ の近傍で 0 ではないから、

$$< \eta, K_E\eta > = < \sqrt{W}\eta, (-\Delta - E)^{-1}\sqrt{W}\eta > = \int_{\mathbf{R}^d} \frac{|(\widehat{\sqrt{W}\eta})(p)|^2}{p^2 - E} dp \overset{E\uparrow 0}{\to} \infty$$

ゆえに、$\lim_{E\uparrow 0} \|K_E\|_{op} = \infty$. □

つまり、$d = 1, 2$ の場合の特徴は $E \to 0$ としたときに Birman-Schwinger kernel が発散することにあるのだが、$d = 2$ のときは、Stoiciu [6] による次の結果がある。

**Theorem 4** $d=2$ のとき、

$$N_{(-\infty,0)}(H) \leq 1 + \int_{\mathbf{R}^2}\int_{\mathbf{R}^2} |V(x)||V(y)|\Big|C_1 \log|x-y| + C_2\Big|^2 dxdy. \qquad (7)$$

ここで、$C_1 = -\frac{1}{2\pi}$, $C_2 = \frac{\log 2-\gamma}{2\pi}$, $\gamma$ はオイラー定数である。

(1) のときと同様、不等式 (7) の右辺が有限であるような $V$ に対しては、$-\Delta+V$ は 2 次形式により、適当な定義域上において自己共役作用素として定義され、かつ $\sigma_{ess}(-\Delta+V) = [0,\infty)$ である。(7) の証明は (3) を用いて $N_{(-\infty,0)}(H)$ を書き表わし、Birman-Schwinger kernel の中から $\log\sqrt{-E}$ のついた項を分離すると、これがランク 1 の作用素に対応していることを用いることにより行われる。

*Proof.* (1) の証明と同様、$V=-W\leq 0$, $W\in C_0(\mathbf{R}^2)$ と仮定して証明すれば十分である。$E<0$ を任意にとる。$(-\Delta-E)^{-1}$ の積分核は、第 2 種変形ベッセル関数 $K_0$ を用いて次のように表される。

$$(-\Delta-E)^{-1}(x,y) = \frac{1}{2\pi}K_0(\sqrt{-E}|x-y|).$$

$K_0$ は原点において $\log x$ の特異性を持つが、それを次のように分離する。

$$K_0(x) = -I_0(x)\log x + h(x).$$

ここで、$I_0(x)$ は第 1 種変形ベッセル関数、$h$ は適当な実解析的関数であり、$I_0(0)=1$, $h(0)=\log 2-\gamma$. ここで、$\varphi\in C_0^\infty(\mathbf{R}^2)$ を $\varphi(x) = 1(|x|\leq 1), = 0(|x|\geq 2)$, $0\leq\varphi(x)\leq 1$ となるようにとる。

$$f(x) = -\frac{1}{2\pi}I_0(x)\varphi(x), \quad g(x) = K_0(x) - f(x)\log x$$

とおくと、$f, g$ はともに滑らかな関数で $f(0) = -\frac{1}{2\pi} = C_1$, $g(0) = \frac{\log 2-\gamma}{2\pi} = C_2$. ここで、$K_E$ の積分核を次のように 2 つに分ける。

$$\begin{aligned}
K_E(x,y) &= A_E(x,y) + B_E(x,y)\\
A_E(x,y) &= \sqrt{W(x)}\Big\{\Big(f(\sqrt{-E}|x-y|) - C_1\Big)\log(\sqrt{-E}|x-y|) + C_1\log|x-y|\\
&\qquad + g(\sqrt{-E}|x-y|)\Big\}\sqrt{W(y)}\\
B_E(x,y) &= \sqrt{W(x)}\Big(C_1\log\sqrt{-E}\Big)\sqrt{W(y)}.
\end{aligned}$$

ここで、$B_E$ はランク1であることに注意すると、

$$N_{(-\infty,E])}(-\triangle - W) = N_{[1,\infty)}(A_E + B_E) \le 1 + \|A_E\|_{HS}^2$$
$$= 1 + \int_{\mathbf{R}^2}\int_{\mathbf{R}^2} W(x)\left|\left\{\left(f(\sqrt{-E}|x-y|) - C_1\right)\log\sqrt{-E}|x-y|\right.\right.$$
$$\left.\left. + C_1\log|x-y| + g(\sqrt{-E}|x-y|)\right\}\right|^2 W(y)dxdy.$$

$f, g$ は滑らかであること、$W$ のサポートはコンパクトであることに注意して $E \uparrow 0$ とすることにより、(7) を得る。□

(7) は、より広いクラスのポテンシャルに対して (5) を証明するのには、十分ではない。Khuri, Martin, Wu [1] によると、次のような予想がある。

$$N_{(-\infty,0)}(-\triangle + V) \le 1 + C_1\int_{\mathbf{R}^2}|V|^*(x)\left(\log\frac{|x_0|}{|x|}\right)_+ dx$$
$$+ C_2\int_{\mathbf{R}^2}V_-(x)\left(\log\frac{|x_0|}{|x|}\right)_+ dx + C_3\int_{\mathbf{R}^2}|V_-(x)|dx.$$

ここで、$x_0 \neq 0$, $|V|^*$ は $V$ の symmetric decreasing rearrangement である。この予想を証明するのは困難であろうと推測される。一方、不等式 (6) の証明方法を用いることにより、次の評価は比較的容易に得られる。

**Theorem 5** $V \in L^2(\mathbf{R}^2)$ かつ $V_-(1 + (\log V_-)1_{\{V_-(x)\ge 1\}}) \in L^1(\mathbf{R}^2)$ とすると、$E < 0$ に対し

$$N_{(-\infty,E]}(-\triangle + V) \le \frac{1}{4\pi}\int_{\mathbf{R}^2} dx W(x)\left\{\frac{C_1}{|E|} + C_2\left(\log W(x)1_{\{W(x)\ge 1\}} + 1\right)\right\}.$$

ただし、$W = V_-$, $C_1 = 1$, $C_2 = 1 + e^{-2}$ である。

*Proof.* (1) の証明と同様にして、$V \le 0$, $V \in C_0(\mathbf{R}^2)$ の場合に証明すれば十分である。[3, Theorem XIII.12] の証明と同様に議論することにより、

$$N_{(-\infty,E]}(-\triangle + V) \le \frac{1}{4\pi}\int_{\mathbf{R}^2} dx \int_0^\infty dt \frac{e^{Et}}{t^2}\varphi(tW(x))$$
$$= \frac{1}{4\pi}\int_{\mathbf{R}^2} dx F(x), \tag{8}$$
$$F(x) = \int_0^\infty dt \frac{e^{Et}}{t^2}\varphi(tW(x)).$$

ここで、$G(u) = u - ue^{-u}$ であり、

$$\varphi(u) = \begin{cases} u(1-e^{-u}) & (0 < u \leq 2) \\ G(2) + (u-2)G'(s) & (2 \leq u) \end{cases}$$

$W(x) = 0$ のとき $F(x) = 0$ であるから、$W(x) > 0$ であるような $x$ について考える。$s = tW(x)$ と変数変換すると

$$F(x) = W(x) \int_0^\infty ds \frac{1}{s^2} e^{\frac{E}{W(x)}s} \varphi(s) = W(x)G(x), \tag{9}$$
$$G(x) = \int_0^\infty ds \frac{1}{s^2} e^{\frac{E}{W(x)}s} \varphi(s).$$

以下、$G(x)$ の評価を行う。$A > 0$ を任意にとり、積分を2つに分ける。

$$G(x) = \int_0^A ds \frac{\varphi(s)}{s^2} e^{\frac{E}{W(x)}s} + \int_A^\infty ds \frac{\varphi(s)}{s^2} e^{\frac{E}{W(x)}s} = I + II. \tag{10}$$

すると、

$$\varphi(u) \sim \begin{cases} u^2 & (u \to 0) \\ u & (u \to \infty) \end{cases}$$

であることから、

$$C_1 = \sup_{u \in (0,\infty)} \frac{\varphi(u)}{u^2} < \infty, \quad C_2 = \sup_{u \in (0,\infty)} \frac{\varphi(u)}{u} < \infty$$

であることがわかる。実際、$C_1 = 1, C_2 = 1 + e^{-2}$. $E < 0$ であるから、

$$I \leq C_1 A \tag{11}$$

と評価できる。II については、$u = \frac{|E|}{W(x)}s$ と変換して、

$$II = \int_A^\infty ds \frac{\varphi(s)}{s^2} e^{\frac{E}{W(x)}s} \leq C_2 \int_A^\infty \frac{ds}{s} e^{\frac{E}{W(x)}s} = C_2 \int_{\frac{|E|}{W(x)}A}^\infty \frac{du}{u} e^{-u}.$$

部分積分により、

$$\begin{aligned} \int_{\frac{|E|}{W(x)}A}^\infty \frac{du}{u} e^{-u} &= \left[\log u\, e^{-u}\right]_{\frac{|E|}{W(x)}A}^\infty + \int_{\frac{|E|}{W(x)}A}^\infty \log u\, e^{-u} du \\ &= -\log \frac{|E|A}{W(x)} e^{-\frac{|E|}{W(x)}A} + \int_{\frac{|E|}{W(x)}A}^\infty \log u\, e^{-u} du. \end{aligned}$$

ここで、第2項は $\int_{\frac{|E|}{W(x)}A}^{\infty} \log u\, e^{-u} du \leq \int_1^{\infty} \log u\, e^{-u} du \leq 1$ と押さえられるから、

$$\int_{\frac{|E|}{W(x)}A}^{\infty} \frac{du}{u} e^{-u} \leq -\log \frac{|E|A}{W(x)} e^{-\frac{|E|}{W(x)}A} + 1. \tag{12}$$

(11), (12) を (10) に代入すると

$$G(x) \leq C_1 A + C_2 \left( -\log \frac{|E|A}{W(x)} e^{-\frac{|E|}{W(x)}A} + 1 \right).$$

(9), (8) と合わせて

$$N_{(-\infty,E]}(-\triangle + V) \leq \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbf{R}^2} W(x) \left\{ C_1 A + C_2 \left( -\log \frac{|E|A}{W(x)} e^{-\frac{|E|}{W(x)}A} + 1 \right) \right\}.$$

$A = |E|^{-1}$ とおいて $\log W(x) e^{-\frac{1}{W(x)}} \leq \log W(x) 1_{\{W(x) \geq 1\}}$ を用いることにより、定理の主張を得る。□

## 参考文献


[1] Khuri, N.N., Martin, A., and Wu, T.T., Bound states in n dimensions, Few-Body Systems **31**, 83-89 (2002).

[2] Lieb, E. H. and Loss, M. : Analysis, Graduate studies in Mathematics, AMS 2000.

[3] Reed, M., Simon, B.: Methods of Modern Mathematical Physics IV, Analysis of Operators, Academic Press, 1978.

[4] Simon, B, : On the number of bound states of two body Schrödinger operators-a review, Studies in Mathematical Physics, Essays in Honor of V. Bargmann, Lieb, Simon, Wightman eds.

[5] Simon, B. : Quantum Mechanics for Hamiltonians Defined as Quadratic Forms, Princeton series in physics.

[6] Stoiciu, M. : An estimate for the number of bound states of the Schrödinger operator in two dimensions, Proc. Amer. Math. Soc.**132**(2004), no.4, 1143-1151.